数理解析研究所講究録
第 1596 巻 2008 年 63-68

Free energy density for mean field perturbation of states of a one-dimensional spin chain

九州大学数理学研究院　大野 博道

本研究では，スピン系（UHF 環）上のシフト不変な状態の，平均エントロピーや圧力関数についての考察を行う．まず，必要な事柄をいくつか定義する．

任意の整数 i に対し，$\mathcal{A}_i = M_d$ とする．ただし，M_d は $d\times d$ 複素行列環である．一次元スピン系（UHF 環）は $\mathcal{A} = \bigotimes_{i\in\mathbb{Z}} \mathcal{A}_i$ で表わされる．さらに任意の有限部分集合 $\Lambda\subset\mathbb{Z}$ に対し，$\mathcal{A}$ の部分環 $\mathcal{A}_\Lambda$ を $\mathcal{A}_\Lambda = \bigotimes_{i\in\Lambda}\mathcal{A}_i$ とする．また，UHF 環上のシフト自己同型写像を γ で表し，UHF 環上のシフト不変（γ-不変）な状態の集合を $S_\gamma(\mathcal{A})$ で表す．さらに，$S_\gamma(\mathcal{A})$ の元 φ に対し，$\varphi_n = \varphi|\mathcal{A}_{[1,n]}$ と書く．

UHF 環上のシフト不変な状態として重要なクラスであるギブス状態を紹介しておく．ギブス状態は以下に定義される相互作用により表わされる状態である．相互作用 Φ は，$\mathbb{Z}$ の有限部分集合から $\mathcal{A}$ への写像で，任意の部分集合 X に対し，$\Phi(\emptyset)=0$ かつ $\Phi(X)=\Phi(X)^*\in\mathcal{A}_X$ を満たすものである．本研究では，Φ は γ-不変，すなわち $\gamma(\Phi(X))=\Phi(X+1)$ を満たし，さらに，有限領域，すなわちある $N\in\mathbb{N}$ が存在して $|\Lambda|>N$ ならば $\Phi(\Lambda)=0$ を満たすとする．この相互作用 Φ と有限部分集合 Λ に対し，局所ハミルトニアンを

$$H_\Lambda(\Phi) = \sum_{X\subset\Lambda}\Phi(X)$$

で表し，局所ギブス状態 φ_Λ^G の密度作用素を

$$D(\varphi_\Lambda^G) = \frac{e^{-H_\Lambda(\varphi)}}{\mathrm{Tr}\, e^{-H_\Lambda(\varphi)}}$$

によって与える．特に，$H_n(\Phi)=H_{[1,n]}(\Phi)$ と書く．γ-不変かつ有限領域の仮定があれば，ギブス条件を満たす状態が唯一存在するので，その状態 φ をギブス状態という．

このギブス状態 φ と，シフト不変状態 $\omega\in S_\gamma(\mathcal{A})$ に対し，圧力関数と平均エントロピーを以下で定義する．

$$\begin{aligned} P(\Phi) &= \lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mathrm{Tr}\, e^{-H_n(\Phi)}, \\ s(\omega) &= \lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}S(\omega_n). \end{aligned}$$

ただし，$S(\omega_n)=\omega_n(-\log D(\omega_n))$ である．すると圧力関数と平均エントロピーの間に変分表現式が成り立つ．すなわち

$$\begin{aligned} P(\Phi) &= \max\{-\omega(A_\Phi)+s(\omega)\,:\,\omega\in S_\gamma(\mathcal{A})\} \\ s(\omega) &= \inf\{\omega(A_\Phi)+P(\Phi)\,:\,\Phi\} \end{aligned}$$

である．ただし，

$$A_\Phi = \sum_{X \ni 0} \frac{\Phi(X)}{|X|}$$

である．本研究では，この変分表現式をより一般化した式を求めることを目的にしている．

定義 1.1. シフト不変状態 φ が，上からの分解性を満たすとは，ある $\alpha \geq 1$ が存在して

$$\varphi \leq \alpha(\varphi|\,\mathcal{A}_{(-\infty,0]}) \otimes (\varphi|\,\mathcal{A}_{[1,\infty)})$$

を満たすときを言う．また，反対の不等号が成り立つとき，下からの分解性を満たすという．

命題 1.2. シフト不変状態 φ が，上からの分解性を満たすとき，任意の $\omega \in S_\gamma(\mathcal{A})$ に対し，平均相互エントロピー

$$S_M(\omega, \varphi) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} S(\omega_n, \varphi_n)$$

が存在する．さらに，写像 $\omega \mapsto S_M(\omega, \varphi)$ はアフィンかつ下半連続である．

証明　任意の $n \geq m$ である $n, m \in \mathbb{N}$ に対し，$n = jm + r$ と書く．ただし，$j \in \mathbb{N}$ かつ $0 \leq r < m$ である．φ が上からの分解性を満たすことから，

$$\varphi_n \leq \alpha^j \left(\bigotimes_{i=0}^{j-1} (\varphi|_{\mathcal{A}_{[im+1,(i+1)m]}}) \right) \otimes (\varphi|_{\mathcal{A}_{[jm+1,jm+r]}}) \tag{1.1}$$

となる．ここで，スピン系 $\bigotimes_{i\in\mathbf{Z}} \mathcal{A}_{[im+1,(i+1)m]}$ 上の直積状態 $\phi^{(m)} := \bigotimes_{\mathbf{Z}} \varphi_m$ を考える．今，任意の $\omega \in S_\gamma(\mathcal{A})$ に対し，平均エントロピーの単調性と(1.1)から，

$$S(\omega_n, \varphi_n) \geq S(\omega_{jm}, \varphi_{jm}) \geq S(\omega_{jm}, \textstyle\bigotimes_1^j \varphi_m) - j \log \alpha \tag{1.2}$$

を得る．(1.2) の両辺を n で割り，$n \to \infty$ をとると（ただし m は固定しておく），

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} S(\omega_n, \varphi_n) \geq \frac{1}{m} S_M^{(m)}(\omega, \phi^{(m)}) - \frac{\log \alpha}{m},$$

となる．ただし，$S_M^{(m)}(\omega, \phi^{(m)})$ は，スピン系 $\bigotimes_{i\in\mathbf{Z}} \mathcal{A}_{[im+1,(i+1)m]}$ 上の平均相互エントロピーである．ここで平均相互エントロピーの性質から，$S_M^{(m)}(\omega, \phi^{(m)}) \geq S(\omega_m, \varphi_m)$ がわかるので，

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} S(\omega_n, \varphi_n) \geq \frac{1}{m} S(\omega_m, \varphi_m) - \frac{\log \alpha}{m}$$

を得る．今，$m \in \mathbb{N}$ が任意であることから，上の式は $S_M(\omega,\varphi)$ が存在することを示しており，さらに

$$S_M(\omega,\varphi) \geq \frac{1}{m} S(\omega_m,\varphi_m) - \frac{\log\alpha}{m} \tag{1.3}$$

であることがわかる．

$\omega \mapsto S_M(\omega,\varphi)$ のアフィン性は，平均エントロピーの性質から帰着される（[4, 5.24]）．今，$\omega, \omega^{(k)} \in S_\gamma(\mathcal{A})$ を弱＊位相で $\omega^{(k)} \to \omega$ となると仮定する．すると，(1.3) と相互エントロピーが下半連続であることより

$$\liminf_{k\to\infty} S_M(\omega^{(k)},\varphi) \geq \frac{1}{m}\liminf_{k\to\infty} S(\omega_m^{(k)},\varphi_m) - \frac{\log\alpha}{m} \geq \frac{1}{m} S(\omega_m,\varphi_m) - \frac{\log\alpha}{m}$$

となる．ここで右辺の m に対し極限をとれば，下半連続性を得る． □

次に，任意の自己共役作用素 $A \in \mathcal{A}_l$ と $n \in \mathbb{N}$ に対し，$h_n = \sum_{k=0}^{n-l} \gamma^k(A)$ とおき，この h_n により圧力関数を摂動させたものを考える．

命題 1.3. シフト不変状態 φ が，上からの分解性を満たすとき，圧力関数

$$p_\varphi(A) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \mathrm{Tr} \exp\big(\log D(\varphi_n) - h_n\big)$$

が存在し，さらに A に対しリプシツ連続である．

証明　まず，$D(\varphi_n)$ は必要であれば εI を足すことにより可逆であると仮定する．この議論は本質的ではないため，本稿では省略する．

任意の $n \geq m$ である $n,m \in \mathbb{N}$ に対し，$n = jm + r$ と書く．ただし，$j \in \mathbb{N}$ かつ $0 \leq r < m$ である．まず，φ が上からの分解性を満たすことより，ある定数 $\alpha \geq 1$ が存在して，n, m にかかわらず

$$D(\varphi_n) \leq \alpha^j \prod_{i=0}^{j-1} \gamma^{im}(D(\varphi_m))$$

とできる．さらに，

$$\sum_{k=0}^{n-l} \gamma^k(A) \geq \sum_{i=0}^{j-1} \gamma^{im}\left(\sum_{k=0}^{m-l} \gamma^k(A)\right) - (j(l-1)+r)\|A\|$$

であることより，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}\exp\big(\log D(\varphi_n) - h_n\big)\\ &\quad\leq \big\{\mathrm{Tr}\exp\big(\log D(\varphi_m) - h_m\big)\big\}^j \exp\big(j\log\alpha + (j(l-1)+r)\|A\|\big)\end{aligned}$$

を得る．この式よりただちに

$$\limsup_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log\mathrm{Tr}\exp\bigl(\log D(\varphi_n)-h_n\bigr)$$
$$\leq\frac{1}{m}\log\mathrm{Tr}\exp\bigl(\log D(\varphi_m)-h_m\bigr)+\frac{\log\alpha}{m}+\frac{l-1}{m}\|A\|\,.$$

であることがわかるので，右辺に m について極限をとることにより圧力関数の存在がわかる．リプシツ連続性は，定義より明らかである． □

さらに φ が上からの分解性を満たし，且つ下からの分解性を満たすとき，変分表現式が成立する．

定理 1.4. シフト不変状態 φ が，上からの分解性を満たし，且つ下からの分解性を満たすとき，変分表現式

$$\begin{aligned} p_\varphi(A) &= \max\{-\omega(A)-S_M(\omega,\varphi)\,:\,\omega\in S_\gamma(\mathcal{A})\} \\ S_M(\omega,\varphi) &= \sup\{-\omega(A)-p_\varphi(A)\,:\,A=A^*\in\mathcal{A}\} \end{aligned}$$

が成り立つ．

証明　まず，一般に有限次元環 $\mathcal{B}=M_d$ 上の状態 $\omega,\rho=\mathrm{Tr}(e^{-H}\cdot)$ と自己共役作用素 h に対し，

$$[\rho^h](A):=\frac{\rho^h(A)}{\rho^h(\mathbf{1})}=\frac{\mathrm{Tr}e^{-H-h}A}{\mathrm{Tr}e^{-H-h}}\qquad(A\in\mathcal{B})\,.$$

と定義するとき，簡単な計算から

$$S(\omega,[\rho^h])=S(\omega,\rho)+\omega(h)+\log\rho^h(\mathbf{1})$$

を得ることができる．この式の左辺が正であることから，

$$\log\rho^h(\mathbf{1})\geq-\omega(h)-S(\omega,\rho)$$

であるが，今，ρ として φ_n をとり，h として h_n をとることにより，

$$\log\mathrm{Tr}\exp(\log D(\varphi_n)-h_n)\geq-\omega_n(h_n)-S(\omega_n,\varphi_n)\,,\qquad\omega\in S_\gamma(\mathcal{A})$$

と書けるが，これは

$$p_\varphi(A)\geq\max\{-\omega(A)-S_M(\omega,\varphi)\,:\,\omega\in S_\gamma(\mathcal{A})\}$$

を表している．

一方，$\phi^{(m)}$ を命題1.2のようにとると，直積状態についての結果から（[4, Proposition 13.8]），任意の $\varepsilon > 0$ に対し，γ^m-不変状態 ψ が存在して，

$$\lim_{j\to\infty} \frac{1}{j} \log \mathrm{Tr} \exp \left(\log D(\phi_{jm}^{(m)}) - \sum_{i=0}^{j-1} \gamma^{im}(h_m) \right) < -\psi(h_m) - S_M^{(m)}(\psi, \phi^{(m)}) + \varepsilon$$

とできる．今，(1.1) より

$$\begin{aligned} \log D(\varphi_{jm}) &\leq \log\big(\textstyle\bigotimes_1^j D(\varphi_m)\big) + j \log \alpha \\ &= \log D(\phi_{jm}^{(m)}) + j \log \alpha \end{aligned}$$

であり，また，

$$\|h_{jm} - \sum_{i=0}^{j-1} \gamma^{im}(h_m)\| \leq jl\|A\|$$

も分かる．さらに，平均相互エントロピーの性質から，$S_M^{(m)}(\psi, \phi^{(m)}) \geq S(\psi_m, \varphi_m)$ であるので，これらを合わせて，

$$\begin{aligned} &\lim_{j\to\infty} \frac{1}{j} \log \mathrm{Tr} \exp (\log D(\varphi_{jm}) - h_{jm}) \\ \leq\ & -\psi(h_m) - S(\psi_m, \varphi_m) + j \log \alpha + jl\|A\| \end{aligned}$$

を得る．今，$\omega = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} \psi \circ \gamma^i$ とおくと，$\omega \in S_\gamma(\mathcal{A})$ であり，さらに

$$|\psi(h_m) - \omega(h_m)| \leq 2l\|A\|$$

より，

$$\begin{aligned} &\lim_{j\to\infty} \frac{1}{j} \log \mathrm{Tr} \exp (\log D(\varphi_{jm}) - h_{jm}) \\ \leq\ & -\omega(h_m) - S(\omega_m, \varphi_m) + j \log \alpha + (2 + j)l\|A\| + \varepsilon \end{aligned}$$

が得られる．この両辺を m で割り，m について極限をとることで

$$p_\varphi(A) \leq \max\{-\omega(A) - S_M(\omega, \varphi) : \omega \in S_\gamma(\mathcal{A})\}$$

がわかる．

第二式は第一式のデュアルの議論から導くことができる [1]. □

参考文献

[1] I. Ekeland and R. Temam, *Convex Analysis and Variational Problems*, Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 1, North-Holland, Amsterdam-Oxford, 1976.

[2] F. Hiai, M. Mosonyi and T. Ogawa, Large deviations and Chernoff bound for certain correlated states on the spin chain, preprint, 2007.

[3] . Hiai, M. Mosonyi, H. Ohno and D. Petz, Free energy density for mean field perturbation of states of a one-dimensional spin chain, arXiv:physics.math-ph/0706.4148, 2007.

[4] M. Ohya and D. Petz, *Quantum Entropy and Its Use*, 2nd edition, Springer-Verlag, 2004.